

PEMODELAN INTERAKSI SENYAWA 2-(2-ASETAMIDOFENIL)-N-(4-NITROFENIL)-2-OKSOASETAMIDA DENGAN ANION CN^- ATAU F^-

VIARDI KURNIANSYAH

Program Studi Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam,
Universitas Sebelas Maret

ABSTRAK

Dua gugus amida ($-\text{CONH}-$) dalam senyawa 2-(2-asetamidofenil)-N-(4-nitrofenil)-2-oksoasetamida (**1**) memiliki sifat proton donor yang dapat digunakan pada kolorimetri untuk mendeteksi anion. Senyawa ini akan lebih bermanfaat bila dapat menunjukkan respon selektif terhadap anion tertentu. Studi mekanika kuantum senyawa **1** telah dilakukan untuk memahami perilaku tersebut dengan diinteraksikan dengan dua anion berbeda (yaitu F^- atau CN^-). Semua struktur dalam penelitian ini dioptimalkan dengan menggunakan metode hibrid *Density Functional Theory* (DFT/B3LYP). Fleksibilitas orbital dari struktur yang diteliti diperoleh dari set dasar 6-311G (d,p), sedangkan spektrum UV dimodelkan oleh *Time Dependent Density Functional Theory* (TD-DFT). Pergeseran bathokromik diamati pada setiap interaksi sebagai berikut: struktur awal 330 nm; gugus oksoasetamida (site 1)— F^- , 387 nm; gugus nitrofenil (site 2)— F^- , 349 nm; gugus oksoasetamida dan nitrofenil (site 3)— F^- , 409 nm; site 1— CN^- , 402 nm; site 2— CN^- , 342 nm; site 3— CN^- , 374 nm; site 1— NC^- , 338 nm; site 2— NC^- , 342 nm; site 3— NC^- , 373 nm.

Penelitian ini juga mengungkapkan bahwa deprotonasi dan/atau polarisasi N–H dapat menyebabkan gangguan muatan pada sistem konjugasi. Peningkatan intensitas penyerapan dan selektivitas anion akan bergantung pada pengaruh interaksi kepada sistem konjugasi. Namun, pengaruh interaksi juga harus mempertimbangkan populasi spesies yang berkontribusi terhadap spektrum secara keseluruhan ketika membandingkan dengan hasil eksperimen.

Kata kunci: mekanika kuantum, teori kerapatan elektron, 2-(2-asetamidofenil)-N-(4-nitrofenil)-2-oksoasetamida, anion F^- , anion CN^-